

digzyme *in silico* DMS



ANCATとは?
ANPLAT 社が提供している、あらゆるデータ解析手段を専門的な知識を持たなくても実施可能なプラットフォームです。

たった
3ステップで
簡単!

①
ANCATの
利用登録

②
クラウド上に
配列UP!

人間が思いつかない
変異箇所を多く予測!

③
**48時間で
解析結果
提供!**

**HIT率
40%***

※公共のデータベースBRENDAに登録されている単変異に対するkcatの予測



***in silico* DMS**

抽出/アッセイが
困難な酵素



酵素活性が
ポケット以外の
予測



変異体数



A社 Iterative
saturation
(ISM)



B社 Library
approach



C社 ランダム



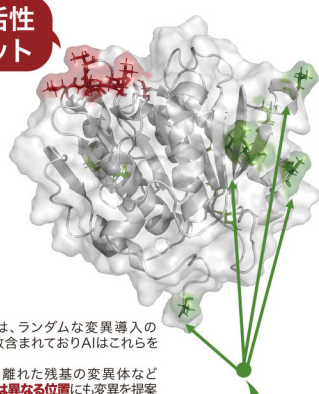
予測結果

mutation	activity predict (out of pocket)	activity up probability 1	thermostability predict	thermostability up probability	solubility predict	solubility up probability	activity predict (in pocket)	activity up probability2	activity ratio3	up prob3
A35V	up	0.67	up	0.71	up	0.69	-	-	down	0.06
A35S	up	0.52	down	0.07	down	0.16	-	-	down	0.08
V30A	up	0.50	down	0.02	down	0.07	-	-	down	0.05
L235T	up	0.43	up	0.74	down	0.41	-	-	stay	0.32
V30I	stay	0.29	down	0.06	up	0.86	-	-	down	0.05
V115A	stay	0.22	up	0.88	up	0.70	-	-	up	0.44
V115L	stay	0.20	down	0.02	up	0.65	-	-	down	0.37
V115M	stay	0.17	down	0.00	down	0.16	-	-	up	0.50
L73F	stay	0.66	up	0.71	-	-	-	-	up	0.61
V115I	stay	0.10	down	0.07	up	0.54	-	-	down	0.29
S186A	stay	0.07	down	0.25	down	0.28	-	-	down	0.13
A140P	stay	0.06	down	0.00	down	0.16	-	-	down	0.09
Q175R	stay	0.03	down	0.069	up	0.59	-	-	down	0.23
Q175R	stay	0.02	down	0.07	up	0.67	-	-	down	0.18
A140N	stay	0.02	down	0.02	down	0.17	-	-	down	0.02
Q175D	stay	0.01	down	0.30	up	0.73	-	-	down	0.23
V172I	stay	0.01	down	0.35	down	0.39	-	-	down	0.02
A65S	down	0.18	down	0.30	up	0.85	up	0.50	down	0.03
L210F	down	0.17	up	0.85	up	0.97	down	0.12	down	0.07

予測傾向

AI独自の変異点を提案可能!

酵素活性
ポケット



・教師データには、ランダムな変異導入の
実験結果が多数含まれておりAIはこれらを
広く学習
・ポケット周辺と離れた残基の変異体など
人間の経験則とは異なる位置にも変異を提案

ポケット外の残基を多数提案!

PoC検証

8社とのPoCを実施!

**NAGASE
TOYOBO**

**Green Earth
Institute**

**TOSOH
他4社**

PoC検証結果

ケース	実験数	機能向上した 変異体の数
酵素A	84	23
酵素B	48	21
酵素C	9	3
酵素D	23	11
酵素E	18	2
酵素F	28	4
酵素G	6	2
酵素H	79	51
酵素I	71	22
酵素J	70	39

代表事例: 自社実験 酵素X

